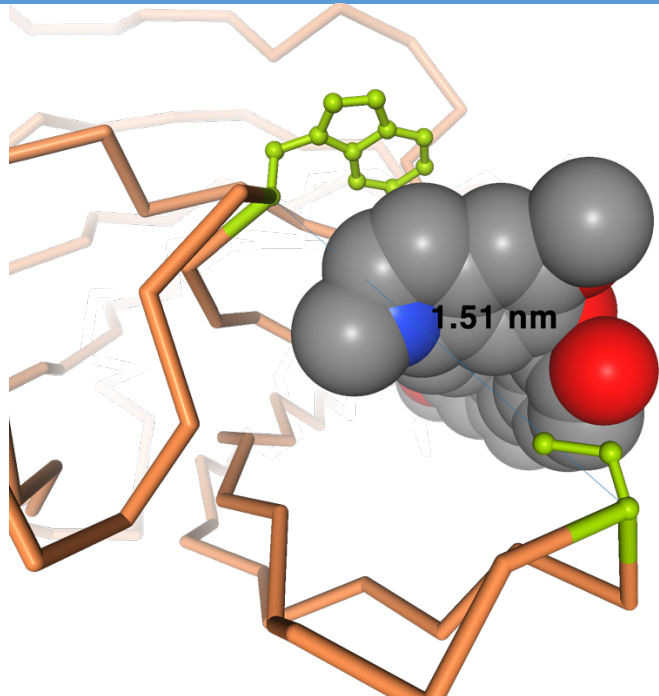
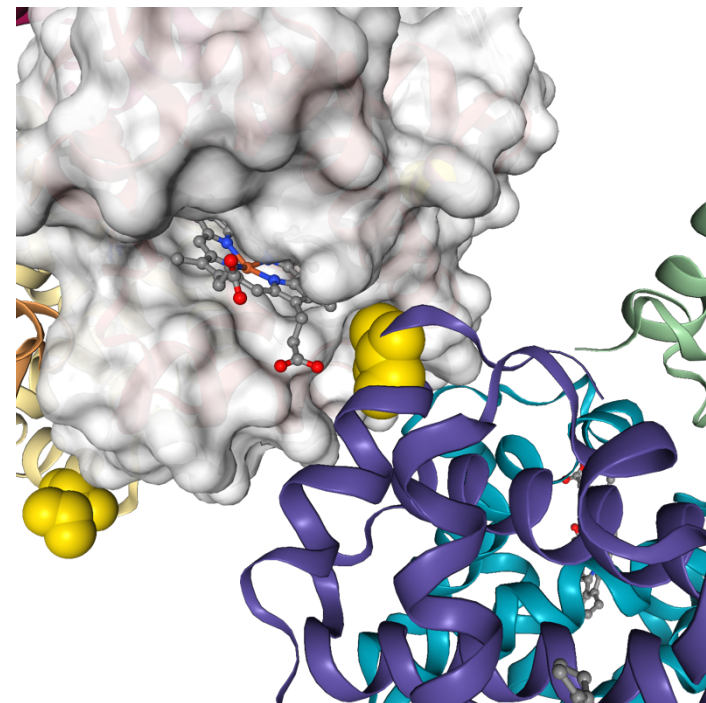
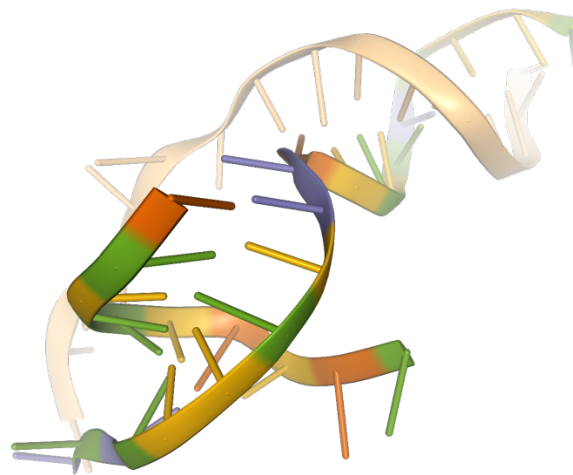


Libmol.org



Renouveler les usages pédagogiques de la visualisation moléculaire

Une application en ligne et un logiciel libre conçus pour que la
résolution de problèmes biologiques soit au premier plan de
la démarche des élèves

1

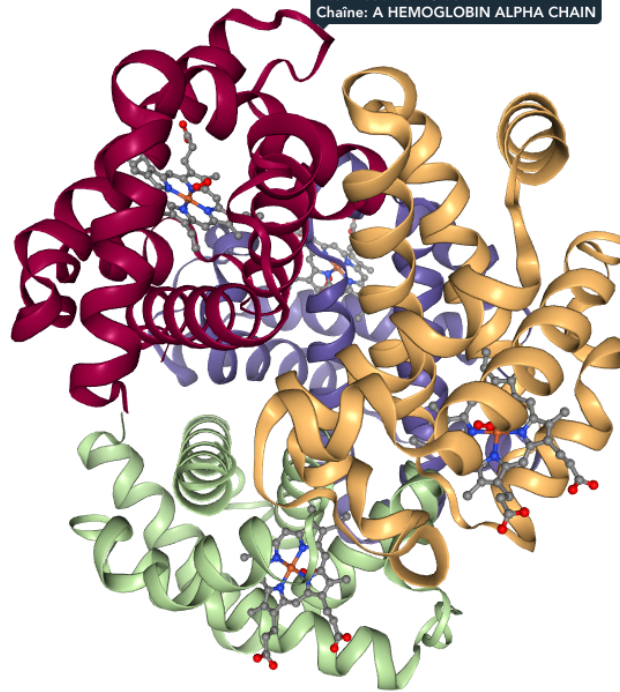
1GZX Hémoglobine humaine oxygénée

Mesures



2

Atome: carbone CA
Res: Histidine HIS 50
Chaîne: A HEMOGLOBIN ALPHA CHAIN



5

Fichiers Commandes Séquence Surfaces

Sélectionner Q

Tout	Protéines	ADN/ARN
Glucides	Eau	Autres

Représenter

Sphères	Boules et bâtonnets	Bâtonnets
Rubans		Squelette

Colorer

Atomes	Chaînes	Résidus
Structure	Nature	Palette

Coloration par chaînes

La coloration par chaînes identifie les différentes chaînes présentes dans le modèle moléculaire et les colore de manière distincte.

Les principales chaînes identifiées sont :

- les **protéines**, constituées d'une ou plusieurs chaînes d'acides aminés,
- les **acides nucléiques** (ADN et ARN), constituées de chaînes de nucléotides.

Les **ligands** (eau, ion, hème, ...) associés à une chaîne (protéine ou acide nucléiques) sont également colorés avec les autres atomes de cette chaîne.

Exemple d'une protéine à 4 chaînes :

Chaînes : **A B C D**

Sélection Masqués

6

3

4

5 Les commandes sont regroupées selon la procédure Sélectionner > Représenter > Colorer
Les **commandes actives** sur la sélection sont mises en relief

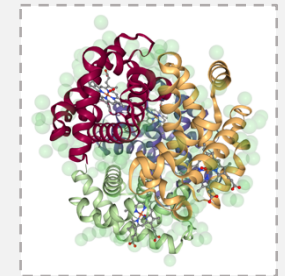
6 L'**aide interactive** s'actualise selon la commande exécutée et renseigne sur sa signification. Des liens hypertextes permettent d'aller plus loin sur les notions abordées (origine des modèles par exemple)

1 Le **titre** indique le nom du modèle actuellement chargé

2 Au survol de la souris, une **étiquette** présente l'atome correspondant et les entités auxquelles il appartient

3 La **légende** informe sur la coloration de la sélection actuelle

4 Les zones actives donnent une visualisation de la **sélection actuelle** et des atomes cachés. Au survol une **silhouette** s'affiche



Une interface ergonomique et intuitive, pour comprendre la complexité des modèles moléculaires

Un mode dédié pour relier la séquence à la structure 3D

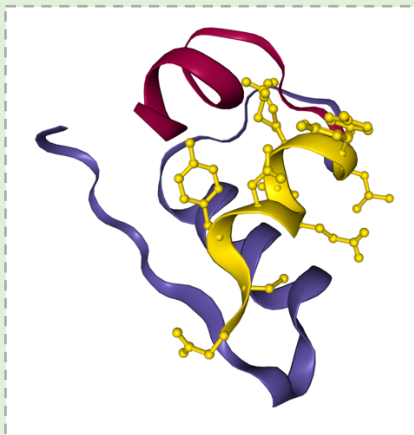
1 Les **séquences** de chaque chaîne sont visualisées sous la forme de colonnes. L'arrière-plan bleu indique la **sélection** actuelle

2 Une **étiquette** de description s'affiche au survol ainsi qu'une **silhouette** dans la fenêtre de visualisation. Un menu contextuel pour le contrôle du **masquage** s'active au clic droit.

LEU 16 - Chaîne A

- Masquer
- Montrer
- Masquer le reste
- Montrer le reste

3 Contrôles rapides de l'**affichage** ou de la **coloration** de la sélection en cours. Les affichages se font en **superposition** des rubans ou des squelettes carbonés s'ils sont présents



Fichiers Commandes Séquence Sur >

Sélectionner à partir des séquences des différentes chaînes

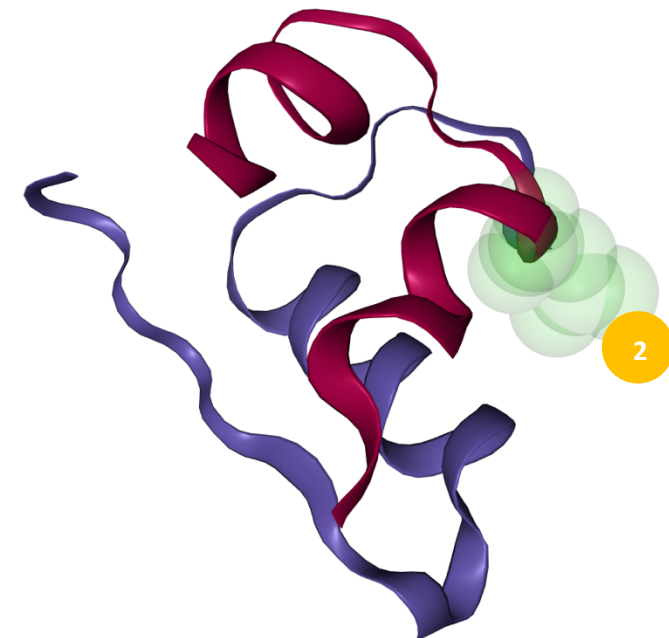
A	B
CYS	CYS
ALA	GLY
SER	SER
VAL	HIS
CYS	LEU
SER	VAL
LEU	LEU 13 Chaîne A
TYR	Leucine
GLN	LEU
LEU	TYR
GLU	LEU
ASN	VAL
TYR	CYS
CYS	GLY

Tout Aucun

Inverser

Sphères Boules et bâtonnets

Masquer/Montrer



Chaînes : **A** **B**

Un assistant intégré à la ligne de commandes

pour ne plus utiliser de « formules magiques » : suggestions en cours de frappe et silhouette témoin

Sélectionner :A and ✓ 202 ✕

Chaîne

- :A Chaîne A (INSULIN A CHAIN (PH 7))

Résidu

- ALA Alanine
- ARG Arginine
- ASN Asparagine

Mot-clé

- and et (opérateur logique d'intersection)
- a11 tous les atomes

Représenter

Colorer

Mesures d'angles et de distances

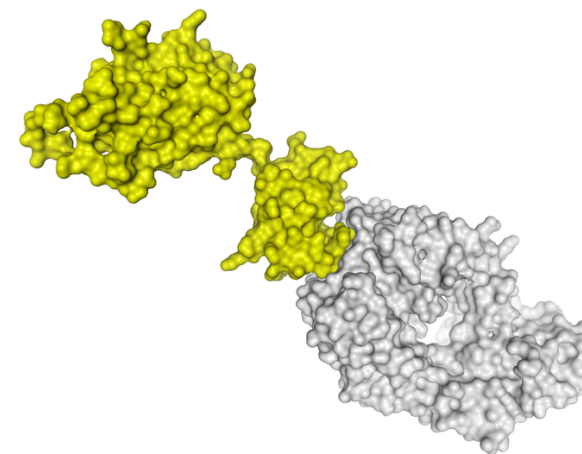
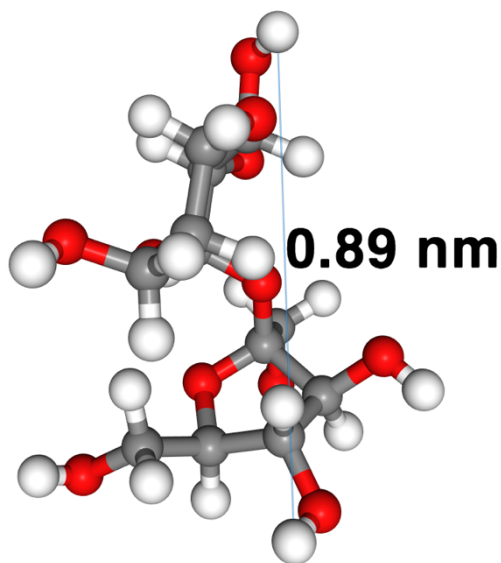
Longueurs exprimées en nm (SI)
Panneau pour contrôler les mesures

Mesures

Distance Angle

Activer la mesure de distances

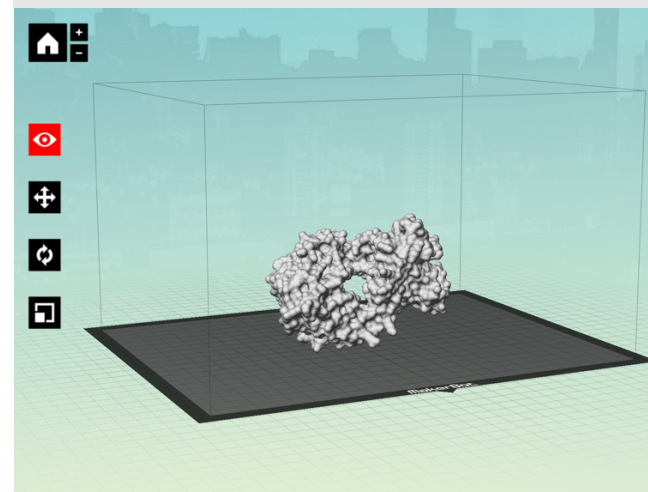
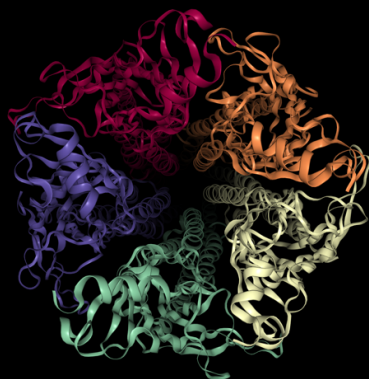
Atome 1	Atome 2	Distance
HO3 31 SUC1	HO4' 43 SUC1	0.89 nm



Des surfaces pour visualiser les volumes et les imprimer en 3D

Des capacités graphiques avancées pour percevoir la 3D

Effet de brouillard d'arrière-plan

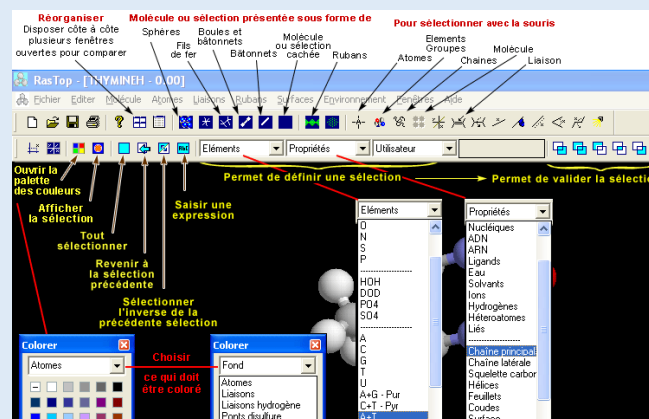


RasTop VS Libmol.org

Créé en 2000, en ajoutant à RasMol une interface d'application pour Windows (multifenêtrage, barre de menus), RasTop a été introduit dans l'enseignement des SVT en 2002. En **2004 il connaît sa dernière évolution** avec l'introduction d'une ligne de commande.

Norey (2012, « Les logiciels de visualisation moléculaire dans l'enseignement des sciences de la vie et de la Terre »), indique : « *Nous sommes arrivés à la conclusion qu'il semble y avoir une saturation de l'usage de ces logiciels. Elle se traduit par un usage ayant peu varié ces dix dernières années [...] Les activités qui utilisent ces logiciels semblent être très guidées (protocolaires) [...] se contentant plutôt de donner à voir [des] représentations* ».

L'interface de RasTop a une **faible affordance** : Les graphismes des icônes ne permettent pas d'en deviner les fonctions, l'accès aux commandes de colorations nécessite une navigation dans 3 niveaux de menus.



L'interface est peu informative : pas de légendes des couleurs, pas d'aide sur les commandes, ... Les temps d'utilisation du logiciel en classe sont longs (« TP RasTop »), nécessitent une fiche technique ce qui réduit le nombre d'utilisations (deux par an d'après Norey), la maîtrise des élèves et donc leur degré d'autonomie. En 15 ans, les enjeux pédagogiques en SVT ont évolué alors que RasTop n'a plus été développé.

Les fonctions de RasTop qu'on ne trouve pas encore dans Libmol.org :

- Comparaison de molécules
- Affichage des liaisons hydrogène
- Enregistrement de sessions

Témoignages d'enseignants comparant Libmol à RasTop

« Rastop est tellement complexe que les élèves passent plus de temps à résoudre des problèmes techniques que des problèmes scientifiques. Et la prise en main même pour les collègues n'est pas toujours évidente... On ne sait jamais comment s'appelle la chaîne, etc... »

« ... je peux leur faire faire la même chose que sur Rastop sans aucun problème. Mes élèves [...] m'ont confirmé que c'était beaucoup plus facile. »

« La commande de libmol est bien plus simple que rastop. Je pense même qu'une fiche d'utilisation n'est pas vraiment indispensable tant l'objectif de chaque commande est clair. »

« J'ai testé Libmol ... et il est en effet beaucoup plus facile d'utilisation que Rastop. Le gros problème reste l'impossibilité de comparer différentes molécules dans plusieurs fenêtres : à mon avis, c'est le seul point négatif... »

« La liberté pédagogique est beaucoup plus grande sur Libmol : travail avec des fichiers en local, à partir de la librairie de molécules ou directement de la PDB. »

Libmol.org

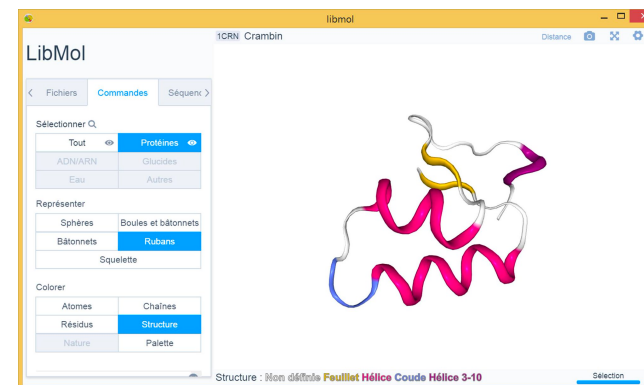
Un projet ouvert et
coopératif

Une application en ligne
Sans installation et toujours actualisée
Intégrable dans Moodle, Genially,...



<https://libmol.org>

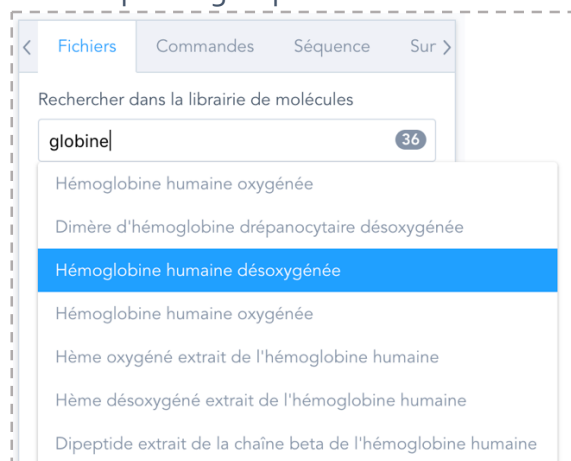
Un logiciel Win/Mac
Indépendant d'une connexion internet
En local, sur clé USB ou sur un réseau



<https://libmol.org/downloads>

Librairie de molécules incluse

Des modèles moléculaires issus de la
recherche et didactisés pour l'enseignement
des SVT par un groupe collaboratif



Logiciel libre

- ✓ Librement utilisable
- ✓ Librement modifiable
- ✓ Licence GPL/CeCILL

Lié à la Recherche

Portail vers les données de la Protein
Data Bank. Propulsé par NGL, librairie
scientifique pour les modélisations et
les traitements de données.

Ressources

Fiche technique : <https://libmol.org/docs>

Code source : <https://github.com/ppillot/libmol>

Twitter : #libmol

Et aussi : Forum national SVT, Groupe
facebook SVT : partage, conseils, questions

Avec les contributions de

P. Pillot (conception & développement), H.
Furstoss (aide intégrée), les tests et les conseils de
P. Cosentino, S. Beaudin, S. Gruszka, G. Gutjahr, J.
Janin, E. Jourdan, V. Rambaud, F. Labaune, L.
Delorme, A. Kervarrec, D. Bard, A. Casanova, M.
Brez, E. Follien, T. Garrigues, S. Rodot, P. Ferrand,
N. Sellal, M. Fenaert, F. Hulot...